

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0518U000789

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-10-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Теус Сергій Миронович

2. Teus Sergiy Myronovych

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.13

Назва наукової спеціальності: Фізика металів

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 03-10-2018

Спеціальність за освітою: Прикладні математика і фізика

Місце роботи здобувача: Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульв. акад. Вернадського, 36, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.168.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульв. акад. Вернадського, 36, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульв. акад. Вернадського, 36, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19

Тема дисертації:

1. Вплив водню на міжатомну взаємодію, фазові перетворення та властивості дислокацій в сплавах на основі 3d-металів

2. Hydrogen effect on interatomic interactions, phase transformations and dislocation properties in 3d metals-based alloys

Реферат:

1. Дисертація присвячена дослідженню явища водневої крихкості в конструкційних матеріалах на основі 3d перехідних металів. Використовуючи комплекс теоретичних та експериментальних методів досліджень, проаналізовано наявні в літературі механізми водневої крихкості, досліджено особливості впливу водню на електронну структуру, фазові переходи і властивості дислокацій в сплавах на основі заліза, титану та нікелю, та наслідки цього впливу для макроскопічних механічних властивостей відповідних матеріалів.

Використовуючи азот та вуглець в якості індикаторів кореляції між електронною структурою і механічними властивостями, проведено верифікацію електронної концепції посиленої воднем локалізованої пластичності. Запропонована концепція дозволяє врахувати хімічну природу елементів втілення та коректно спрогнозувати їх вплив на властивості дислокацій, що є основним положенням моделі спричиненої воднем крихкості. Додатковою перевагою даної концепції у порівнянні з моделлю, розробленою в рамках механіки

суцільних середовищ, є здатність запропонувати практичні рекомендації для підвищення опору матеріалу водневій крихкості. За допомогою методики механічної спектроскопії, шляхом дослідження явища релаксації Снука-Кьостера, показано, що атмосфери азоту сприяють мобільності дислокацій, тоді як атоми вуглецю перешкоджають дислокаційному ковзанню. З використанням розрахунків із перших принципів встановлено кореляцію між впливом атомів азоту та вуглецю на електронну структуру заліза та властивостями дислокацій. Відповідно, спричинене азотом підвищення концентрації вільних електронів, подібно до атомів водню, має підвищувати рухливість дислокацій, що повністю узгоджується з експериментальними даними. Базуючись на теоретичних розрахунках термодинаміки фазових перетворень, а також шляхом дослідження еволюції кристалографічної текстури зразків показано, що при інтерпретації індукованих воднем фазових перетворень, окрім механічного ефекту, через неоднорідний профіль розподілу водню по глибині, потрібно приймати до уваги і термодинамічний фактор внаслідок різного впливу водню на вільну енергію фаз які реалізуються в системі. При цьому, саме пластична деформація, а не лише напруження, є справжньою причиною подібності деформаційно-індукованих та викликаних наводненням мартенситів. За допомогою методів молекулярної динаміки та авторадіографію, доведено, що межі зерен виконують роль пасток для атомів втілення, зокрема водню та вуглецю, в залізі. Запропоновано пояснення прискореної міграції атомів водню вздовж меж зерен, що спостерігається в деяких експериментах, у відповідності з яким, подібна поведінка є наслідком індукованої воднем пластичної деформації і відповідного транспорту атомів водню дислокаціями, а також утворення мікротріщин в околі меж зерна, як наслідок катодного наводнення, яке завжди використовується при вимірюваннях водневої проникності. За допомогою теоретичних та експериментальних досліджень показано подібний характер впливу водню на електронну структуру та властивості дислокацій в сплавах на основі титану та нікелю, що є додатковим підтвердженням коректності електронної концепції посиленої воднем локалізованої пластичності і вказує на загальний характер запропонованого механізму водневої крихкості. Зокрема, на цій основі дано пояснення істотній різниці в прояві водневої крихкості в сплавах на основі α -титану та в аустенітних сталях, що дає змогу використовувати водень в якості легувального елементу для покращення деформаційних характеристик титанових сплавів в однофазному α стані під час їх технологічної обробки. Детальний аналіз термодинамічних та кінетичних процесів в системі нікель – водень дозволив зробити висновок, що так званий гідрид нікелю є наслідком розділу наводненого твердого розчину на збагачену воднем та збіднену атомами водню фази за спінодальним механізмом. Проведено порівняння між явищами спричиненої воднем крихкості та рідиннометалічної крихкості. За допомогою розрахунків із перших принципів, на прикладі атомів йоду, показано, що їх вплив на електронну структуру матеріалу є подібним до впливу водню. Теоретично передбачене підвищення атомами йоду концентрації вільних електронів в сплавах на основі заліза підтверджено проведеними експериментальними вимірюваннями за допомогою електронного спінового резонансу. Методика механічної спектроскопії, також, дозволила виявити подібний вплив атомів йоду та галію на властивості дислокацій, що проявляється у ранньому старті мікропластичної деформації та підвищенні рухливості дислокацій. Отримані результати є підтвердженням однакового механізму водневої та рідиннометалічної крихкостей, а також можливості пояснення обох явищ в рамках електронної концепції локалізованої пластичності, посиленої елементом, який підвищує металічний характер міжатомного зв'язку.

2. The thesis is devoted to the study of hydrogen embrittlement phenomena in 3d transition metals-based construction materials. By means of theoretical and experimental techniques, the mechanisms of hydrogen brittleness available in the literature are analyzed. At the same time, peculiarities of hydrogen effect on the electron structure, phase transformations and dislocation properties in iron-, titanium- and nickel- based alloys were studied and the consequences for macroscopic mechanical properties of corresponding materials were derived. Using nitrogen and carbon as indicators of correlations between electron structure and mechanical properties, the verification of electron concept of hydrogen enhanced localized plasticity has been performed. The proposed concept allows to take into account the chemical nature of interstitial elements and correctly predict their influence on dislocation properties that is the main point of hydrogen-caused brittleness model. An additional advantage of the proposed concept, in comparison with the model developed within the framework of

continuum mechanics, is the possibility to propose practical recommendations for the increase in materials resistance to hydrogen brittleness. Using mechanical spectroscopy, the Snoek-Koester relaxation was studied and it was shown that nitrogen atmospheres assist dislocations mobility, whereas, in contrast, carbon atoms retard dislocations slip. Using first principle calculations, a correlation between the carbon and nitrogen effects on the iron electron structure and dislocation properties is established. Correspondingly, similarly to hydrogen, the nitrogen-caused increase in the concentration of free electrons should assist mobility of dislocations, which is in a perfect consistency with experimental data. Based on the theoretical results on the thermodynamics of phase transitions in the iron-based alloys and studies of crystallographic texture evolution, it was shown that during the interpretation of hydrogen induced phase transitions, along with inhomogeneous profile of hydrogen distribution on the depth, the thermodynamic factors also have to be considered because of different hydrogen effect on the free energy of phases in this system. At the same time, the plastic deformation, not only stresses, is a true reason for similarity between deformation-induced and hydrogen-induced epsilon-martensites. The molecular dynamic calculations and autoradiography method allow to confirm that grain boundaries are the traps for interstitial atoms, particularly hydrogen and carbon in the iron. An approach is proposed to explain the enhanced migration of hydrogen atoms along the grain boundaries that is observed in hydrogen permeation measurements. According to this approach, such a behavior results from hydrogen-induced plastic deformation and corresponding transport of hydrogen atoms by dislocations, and also could be a consequence of microcrack formation in the vicinity of grain boundaries in the course of cathodic hydrogen charging which is always used during the hydrogen permeation measurements. By means of theoretical and experimental studies, it was shown that there is similar effect of hydrogen on the electron structure and dislocation properties in titanium- and nickel-based alloys, which is an additional confirmation of correctness of the electron approach to hydrogen-enhanced localized plasticity and shows a general character of this approach for hydrogen brittleness. Particularly, on this basis, the explanation is given for different appearance of hydrogen brittleness in b-titanium alloys and austenitic steels, which allows to use hydrogen as a temporary alloying element during technological treatment of b-titanium alloys in single phase state, to provide their better deformational characteristics. A detailed analysis of thermodynamic and kinetic processes in nickel-hydrogen system allows to conclude that the so-called "nickel hydride" is a consequence of decomposition of hydrogenated solid solution into the hydrogen-rich and hydrogen-depleted phases via spinodal mechanism. A comparison was performed between the phenomena of hydrogen-caused brittleness and liquid metal embrittlement. Using the first principle calculations for the case of iodine in the iron it was shown that its effect on the electron structure of a material is similar to that in case of hydrogen. The theoretically predicted iodine-caused increase in the concentration of free electrons in the iron-based alloys has been confirmed by the experimental measurements using the electron spin resonance. The mechanical spectroscopy also allows to detect a similar effect of iodine and gallium atoms on the dislocation properties, which results in the earlier start of microplastic deformation and increased dislocations mobility. The obtained results confirm a similar mechanism of hydrogen and liquid metal brittlenesses.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гаврилюк Валентин Геннадійович
2. Gavriljuk Valentyn Gennadiyovich

Кваліфікація: д. т. н., 05.16.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гаврилюк Валентин Геннадійович
2. Gavriljuk Valentyn Gennadiyovich

Кваліфікація: д. т. н., 05.16.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Фірстов Сергій Олексійович

2. Firstov Sergiy Oleksiyovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Воеводін Віктор Миколайович

2. Voyevodin Viktor Mykolayovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рево Сергій Лукич

2. Revo Sergiy Lukych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради

Івасишин Орест Михайлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні

Івасишин Орест Михайлович

Відповідальний за підготовку
облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності



Юрченко Т.А.